

(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0036504
(43) 공개일자 2016년04월04일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 495/12 (2006.01)
C07D 495/14 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07D 495/12 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2015-0134438

(22) 출원일자 2015년09월23일
심사청구일자 없음

(30) 우선권주장
1020140128116 2014년09월25일 대한민국(KR)

(71) 출원인
룸엔드하스전자재료코리아유한회사
충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)

(72) 발명자
양정은
경기도 수원시 팔달구 덕영대로697번길 48, 403동
1203호 (화서동, 화서주공아파트)
김치식
경기도 화성시 동탄 반석로 71 쌍용예가 아파트
441-1201
김빛나리
경기도 안양시 동안구 동안로 101 목련선경아파트
102-2401

(74) 대리인
장훈

전체 청구항 수 : 총 6 항

(54) 발명의 명칭 신규한 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

본 발명은 신규한 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 종래의 유기 전계 발광 화합물에 비해 발광 효율이 높고, 본 발명의 화합물을 유기 EL 소자의 발광층에 사용하는 경우 발광층에서의 정공과 전자의 전하 밸런스가 잘 이루어지고, 소자의 전류/전력 효율이 높아지고, 구동 전압이 저하되어 수명이 길어진다.

(52) CPC특허분류

C07D 495/14 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1011 (2013.01)

C09K 2211/1037 (2013.01)

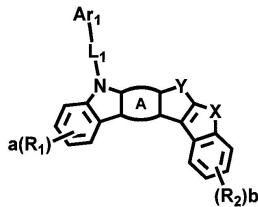
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

A 고리는 치환 또는 비치환된 (C6-C30) 아릴환, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원) 헤테로아릴환이고,

X 및 Y는 각각 독립적으로 O, S, CR₁₁R₁₂ 또는 NR₁₃이며,

L₁은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고,

Ar₁은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며,

R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나, 서로 인접한 치환체와 연결되어 (C3-C30)단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

R₁₁ 및 R₁₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 서로 인접한 치환체와 연결되어 (C3-C30)단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 치환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

R₁₃은 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며,

a 및 b는 0 내지 4의 정수이고, a 또는 b가 2 이상인 경우 각각의 R₁ 또는 R₂는 동일하거나 상이할 수 있고,

상기 헤테로아릴 및 헤테로아릴렌은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 화학식 1에서 치환 알킬, 치환 시클로알킬, 치환 아릴(렌), 치환 헤테로아릴(렌) 및 치환 알콕시의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카르복실, 나이트로, 히드록시, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, (C2-C30)알케닐,

(C2-C30)알킬닐, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 것인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 3

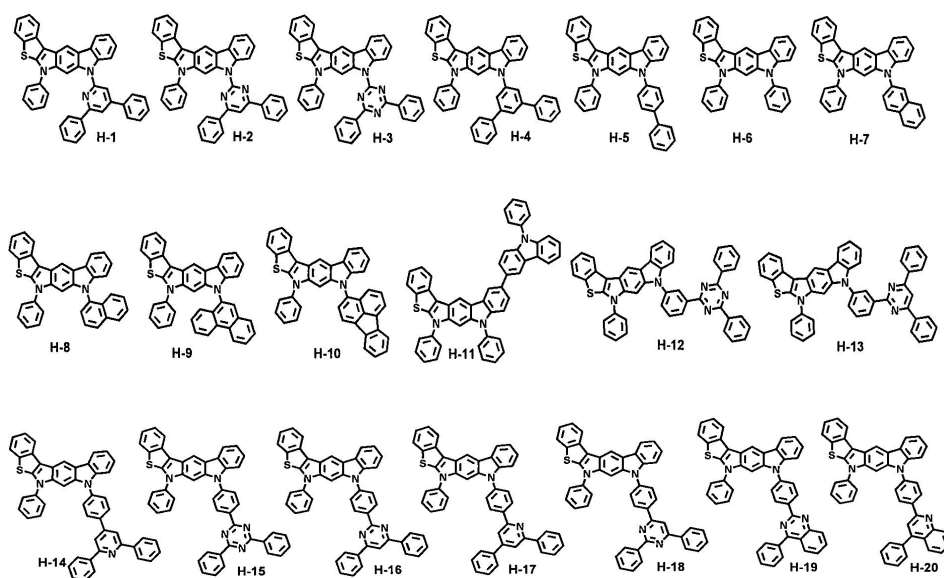
제1항에 있어서, A 고리가 치환 또는 비치환된 (C6-C12) 아릴환, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원) 헤테로아릴환이고, X 및 Y가 각각 독립적으로 O, S, CR₁₁R₁₂ 또는 NR₁₃이며, L₁이 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원) 헤테로아릴렌이고, Ar₁이 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이며, R₁ 및 R₂가 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아르알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C7)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아르(C1-C10)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬(C6-C12)아릴아미노이고, R₁₁ 및 R₁₂가 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아르알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C7)시클로알킬이며, R₁₃이 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아르알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C7)시클로알킬인, 유기 전계 발광 화합물.

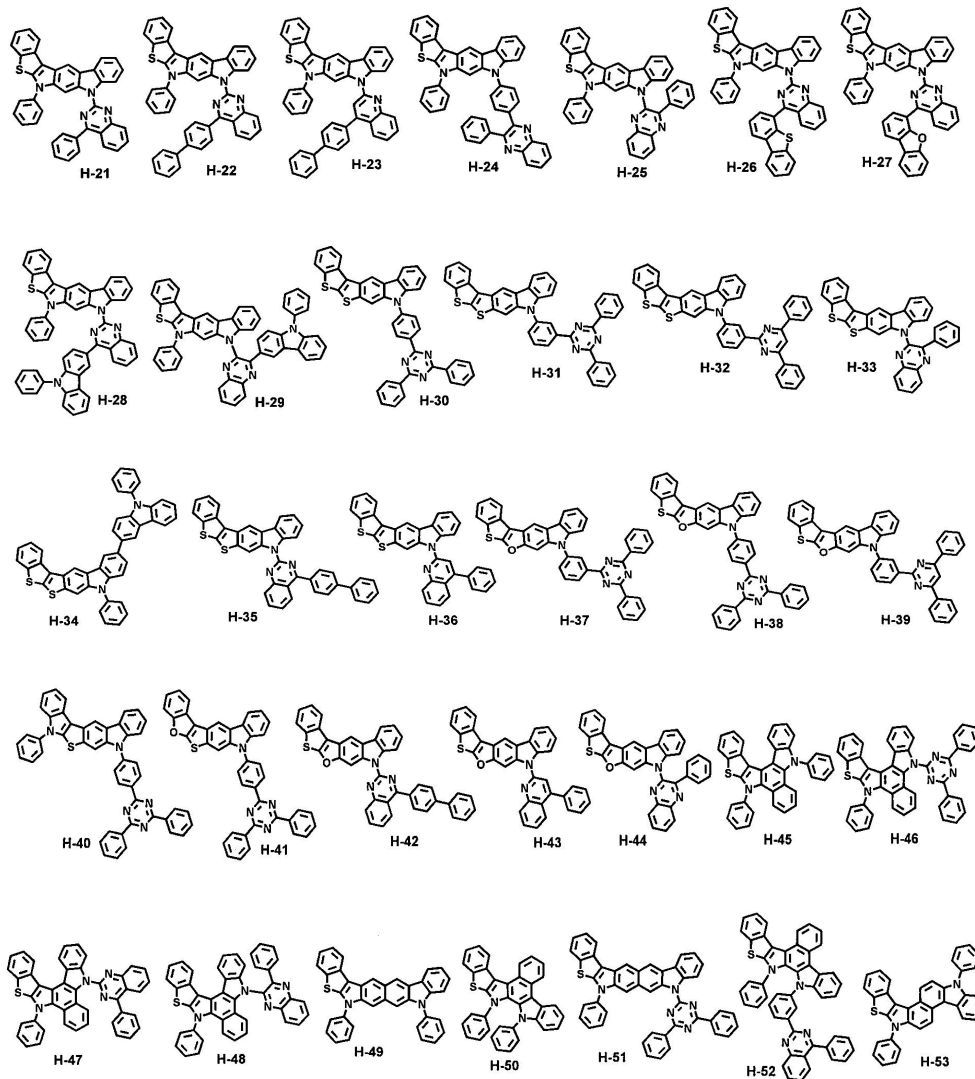
청구항 4

제1항에 있어서, A 고리가 치환 또는 비치환된 (C6-C12) 아릴환이고, X 및 Y가 각각 독립적으로 O, S 또는 NR₁₃이며, L₁이 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌이고, Ar₁이 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이며, R₁ 및 R₂가 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고, R₁₃이 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴인, 유기 전계 발광 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로부터 선택되는 것인, 유기 전계 발광 화합물.





청구항 6

제1항에 기재된 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 신규한 유기 전계 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 전계 발광 소자(electroluminescence device: EL 소자)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[참조: Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescence device)는 유기 발광재료에 전기를 가해 전기 에너지를 빛으로 바꾸는 소자로서, 통상 양극(애노드) 및 음극과 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 유기 전계 발광 소자의 유기물층은 정공주입층, 정공전달층, 전자차단층, 발광층(호스트 및 도판트 재료 포함), 전자버퍼층, 정공차단층, 전자전달층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있으며, 유기물층에 사용되는 재료는 기능에 따라 정공주입재료, 정공전달재료, 전자차단재료, 발광재료, 전자버퍼재료, 정공차단재료, 전자전달재료, 전자주

입재료 등으로 나뉜다. 이러한 유기 전계 발광 소자에서는 전압 인가에 의해 양극에서 정공이, 음극에서 전자가 발광층에 주입되고, 정공과 전자의 재결합에 의해 에너지가 높은 엑시톤이 형성된다. 이 에너지에 의해 발광 유기 화합물이 여기 상태로 되며, 발광 유기 화합물의 여기 상태가 기저 상태로 돌아가면서 에너지를 빛으로 방출하여 발광하게 된다.

[0004] 유기 전계 발광 소자의 발광재료는 소자의 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인으로서, 발광재료는 양자 효율이 높고 전자와 정공의 이동도가 커야 하고, 형성된 발광재료층은 균일하고 안정해야 한다. 이러한 발광재료는 발광색에 따라 청색, 녹색 또는 적색 발광재료로 나뉘고, 추가로 황색 또는 주황색 발광재료도 있다. 또한, 발광재료는 기능적인 측면에서 호스트 재료와 도판트 재료로 구분될 수 있다. 최근에 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자의 개발이 시급한 과제로 대두되고 있는데, 특히 중대형 OLED 패널에서 요구하고 있는 EL 특성 수준을 고려해 볼 때 기존의 발광재료에 비해 매우 우수한 재료의 개발이 시급한 실정이다. 이를 위하여 고체 상태의 용매 및 에너지 전달자 역할을 하는 호스트 물질의 바람직한 특성은 순도가 높아야 하며, 진공증착이 가능하도록 적당한 분자량을 가져야 한다. 또한 유리전이온도와 열분해온도가 높아 열적 안정성을 확보해야 하며, 장수명화를 위해 높은 전기화학적 안정성이 요구되며, 무정형 박막을 형성하기 용이해야 하며, 인접한 다른 층의 재료들과는 접착력이 좋은 반면 층간 이동은 하지 않아야 한다.

[0005] 현재까지 이리듐(III) 착물 계열이 인광 발광재료로 널리 알려져 있으며, 각각의 적색, 녹색 및 청색 발광별료(acac)Ir(btp)₂(비스(2-(2'-벤조티에닐)-피리디네이트-N,C3')이리듐(아세틸아세토네이트)), Ir(ppy)₃(트리스(2-페닐피리딘)이리듐) 및 Firpic(비스(4,6-디플루오로페닐피리디네이트-N,C2)피콜리네이트이리듐) 등의 재료가 알려져 있다.

[0006] 발광재료는 색순도, 발광 효율 및 안정성을 향상시키기 위해 호스트와 도판트를 혼합하여 사용할 수 있다. 이와 같은 도판트/호스트 재료 체계를 사용할 때, 호스트 재료는 발광 소자의 효율과 성능에 큰 영향을 미치므로, 그 선택이 중요하다. 종래 기술에서, 인광 호스트 재료로는 4,4'-N,N'-디카바졸-바이페닐(CBP)이 가장 널리 알려져 있었다. 최근에는, 일본의 파이오니아 등이 정공차단층의 재료로 사용되던 바토크프로인(Bathocuproine, BCP) 및 알루미늄(III) 비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(4-페닐페놀레이트)(Balq) 등을 호스트 재료로 이용해 고성능의 유기 EL 소자를 개발한 바 있다.

[0007] 그러나, 기존의 이러한 인광 호스트 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 다음과 같은 단점이 있다: (1) 유리 전이 온도가 낮고 열적 안정성이 낮아서, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거칠 때, 물질이 변한다. (2) 유기 EL 소자에서 전력 효율 = $[(\pi/\text{전압}) \times \text{전류 효율}]$ 의 관계에 있으므로 전력 효율은 전압에 반비례한다. 인광용 호스트 재료를 사용한 유기 EL 소자는 형광 호스트 재료를 사용한 유기 EL 소자에 비해 전류 효율(cd/A)은 높으나, 구동 전압 역시 상당히 높기 때문에 전력 효율(lm/W) 면에서 큰 이점이 없다. (3) 유기 EL 소자에 사용할 경우, 작동 수명 측면에서도 만족스럽지 못하며, 발광 효율도 여전히 개선이 요구된다.

[0008] 따라서, 유기 EL 소자의 우수한 특성을 구현하기 위해서는 소자내 유기물층을 구성하는 재료들, 특히 발광재료를 구성하는 호스트 또는 도판트를 적절히 선택해야 한다. 한편, 대한민국 공개특허공보 제10-2013-0139916호 및 제10-2013-0093460호는 호스트 재료로 사용되는 질소-함유 방향족 복소환 화합물을 기재하고 있다. 그러나, 상기 공개특허공보들에 개시된 화합물을 포함한 유기 EL 소자들은 전력 효율, 발광 효율, 수명 등의 측면에서 여전히 만족스럽지 않다.

[0009] 이에, 본원 발명자들은 전자 전달 효율이 우수한 호스트 화합물을 찾고자 연구한 결과, 본 발명의 화합물이 종래의 유기 전계 발광 화합물에 비해 발광 효율이 높고, 본 발명의 화합물을 유기 EL 소자의 발광층에 사용하는 경우 발광층에서의 정공과 전자의 전하 밸런스가 잘 이루어지고, 소자의 전류/전력 효율이 높아지고, 구동 전압이 저하되어 수명이 길어짐을 밝혀냈다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0010] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허공보 제10-2013-0139916호 (공개일: 2013년 12월 23일)
(특허문헌 0002) 대한민국 공개특허공보 제10-2013-0093460호 (공개일: 2013년 8월 22일)

발명의 내용

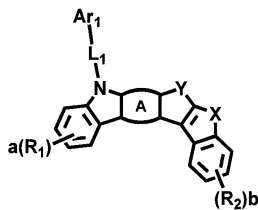
해결하려는 과제

[0011] 따라서 본 발명의 목적은 첫째로, 발광 효율이 높은 유기 전계 발광 화합물을 제공하는 것이며 둘째로, 상기 유기 전계 발광 화합물을 발광층에 포함하는, 구동 전압이 낮고 전류/전력 효율이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0012] 상기의 기술적 과제를 해결하기 위해 예의 연구한 결과, 본 발명자들은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물이 상술한 목적을 달성함을 발견하여 본 발명을 완성하였다.

[0013] [화학식 1]



[0014]

[0015] 상기 화학식 1에서,

[0016] A 고리는 치환 또는 비치환된 (C6-C30) 아릴환, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원) 헤테로아릴환이고,

[0017] X 및 Y는 각각 독립적으로 O, S, CR₁₁R₁₂ 또는 NR₁₃이며,

[0018] L₁은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고,

[0019] Ar₁은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며,

[0020] R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노이거나, 서로 인접한 치환체와 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

[0021] R₁₁ 및 R₁₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 서로 인접한 치환체와 연결되어 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 지환족 또는 방향족 환을 형성할 수 있고, 상기 형성된 지환족 또는 방향족 환의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 대체될 수 있고,

[0022] R₁₃은 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며,

[0023] a 및 b는 0 내지 4의 정수이고, a 또는 b가 2 이상인 경우 각각의 R₁ 또는 R₂는 동일하거나 상이할 수 있고,

[0024] 상기 헤테로아릴 및 헤테로아릴렌은 B, N, O, S, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.

발명의 효과

[0025] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 소자의 구동 전압을 저하시키고 동시에 전류/전력 효율을 향상시킬 수

있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0026] 이하에서 본 발명을 더욱 상세히 설명하나, 이는 설명을 위한 것으로 본 발명의 범위를 제한하는 것으로 해석되어서는 안된다.
- [0027] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기 전계 발광 화합물, 상기 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.
- [0028] 본 발명의 화학식 1의 화합물에서, 바람직하게는, A 고리는 치환 또는 비치환된 (C6-C12) 아릴환, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원) 헤테로아릴환이고, X 및 Y는 각각 독립적으로 O, S, CR₁₁R₁₂ 또는 NR₁₃이며, L₁은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원) 헤테로아릴렌이고, Ar₁은 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이며, R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아르알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C7)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아르(C1-C10)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴아미노, 또는 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬(C6-C12)아릴아미노이고, R₁₁ 및 R₁₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아르알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C7)시클로알킬이며, R₁₃은 치환 또는 비치환된 (C1-C10)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아르알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C7)시클로알킬이다.
- [0029] 본 발명의 화학식 1의 화합물에서, 더욱 바람직하게는, A 고리는 치환 또는 비치환된 (C6-C12) 아릴환이고, X 및 Y는 각각 독립적으로 O, S 또는 NR₁₃이며, L₁은 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴렌이고, Ar₁은 치환 또는 비치환된 (C6-C18)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이며, R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 (5-15원)헤테로아릴이고, R₁₃은 치환 또는 비치환된 (C6-C12)아릴이다.
- [0030] 본원에서 "(C1-C30)알킬"은쇄를 구성하는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알킬을 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 20개인 것이 바람직하고, 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알킬의 구체적인 예로서, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸 및 3급-부틸 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알케닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알케닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알케닐의 구체적인 예로서, 비닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 2-메틸부트-2-에닐 등이 있다. 본원에서 "(C2-C30)알키닐"은쇄를 구성하는 탄소수가 2 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알키닐을 의미하고, 여기에서 탄소수가 2 내지 20개인 것이 바람직하고, 2 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알키닐의 예로서, 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸펜트-2-이닐 등이 있다. 본원에서 "(C1-C30)알콕시"는 탄소수가 1 내지 30개인 직쇄 또는 분지쇄 알콕시를 의미하고, 여기에서 탄소수가 1 내지 20개인 것이 바람직하고, 1 내지 10개인 것이 더 바람직하다. 상기 알콕시의 예로서, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로폭시, 1-에틸프로폭시 등이 있다. 본원에서 "(C3-C30)시클로알킬"은 환 골격 탄소수가 3 내지 30개인 단일환 또는 다환 탄화수소를 의미하고, 여기에서 탄소수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 7개인 것이 더 바람직하다. 상기 시클로알킬의 예로서, 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 등이 있다. 본원에서 "(5-7원)헤테로시클로알킬"은 환 골격 원자수가 5 내지 7개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자, 바람직하게는 O, S 및 N에서 선택되는 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 시클로알킬을 의미하고, 예를 들어, 피롤리딘, 티올란, 테트라히드로피란 등이 있다. 본원에서 "(C6-C30)아릴(렌)"은 환 골격 탄소수가 6 내지 30개인 방향족 탄화수소에서 유래된 단일 환계 또는 융합 환계 라디칼을 의미하고, 여기에서 환 골격 탄소수가 6 내지 20개인 것이 바람직하고, 6 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 상기 아릴의 예로서, 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 플루오레닐, 페난트레닐, 안트라세닐, 인데닐, 트리페닐레닐, 피레닐, 테트라세닐, 페릴레닐, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐 등이 있다. 본원에서 "(3-30원)헤테로아릴(렌)"은 환 골격 원자수가 3 내지 30개이고, B, N, O, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 아릴기를 의미한다. 여기에서 환 골격 원자수가 3 내지 20개인 것이 바람직하고, 3 내지 15개인 것이 더 바람직하다. 헤테로원

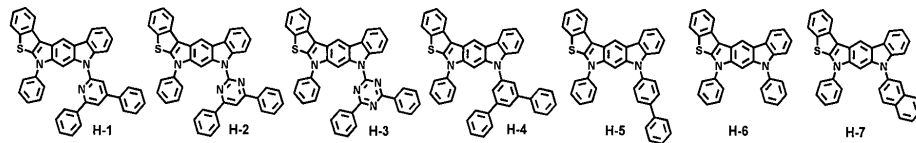
자수는 바람직하게는 1 내지 4개이고, 단일 환계이거나 하나 이상의 벤젠환과 축합된 융합 환계일 수 있으며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본원에서 상기 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴기 또는 아릴기가 단일 결합에 의해 헤테로아릴기와 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴의 예로서, 푸릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라잔일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단일 환계 헤테로아릴, 벤조푸란일, 벤조티오펜일, 이소벤조푸란일, 디벤조푸란일, 디벤조티오펜일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페녹사진일, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 융합 환계 헤테로아릴 등이 있다. 본원에서 "할로젠"은 F, Cl, Br 및 I 원자를 포함한다.

[0031]

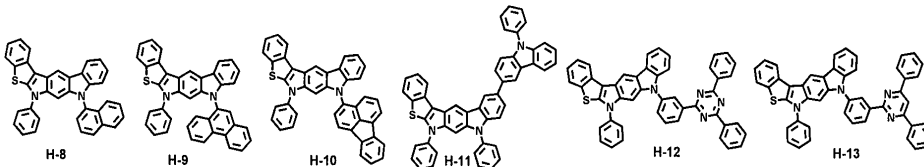
또한, 본원에 기재되어 있는 "치환 또는 비치환"이라는 기재에서 "치환"은 어떤 작용기에서 수소 원자가 다른 원자 또는 다른 작용기(즉, 치환체)로 대체되는 것을 뜻한다. 본 발명에서 치환 알킬, 치환 알케닐, 치환 알키닐, 치환 시클로알킬, 치환 아릴(렌), 치환 헤테로아릴(렌), 치환 알콕시 및 치환 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환의 치환체는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노, 카복실, 나이트로, 히드록시, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알콕시, (C1-C30)알킬티오, (5-30원)헤테로아릴로 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, (C6-C30)아릴로 치환 또는 비치환된 (5-30 원)헤테로아릴, (C3-C30)시클로알킬, (C3-C30)시클로알케닐, (3-7 원)헤테로시클로알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, 아미노, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, 모노- 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노- 또는 디(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬카보닐, (C1-C30)알콕시카보닐, (C6-C30)아릴카보닐, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬 및 (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 치환체이다.

[0032]

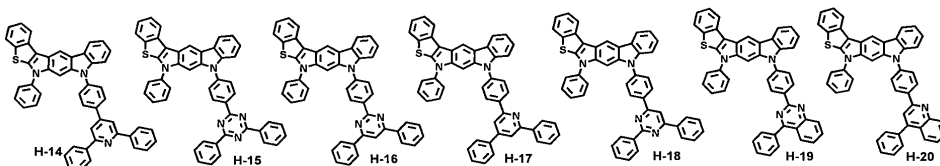
본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물의 예로는 하기의 화합물을 들 수 있다.



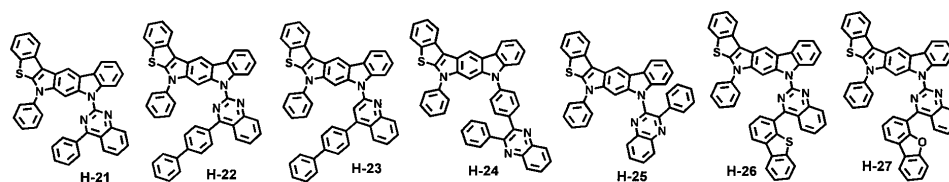
[0033]



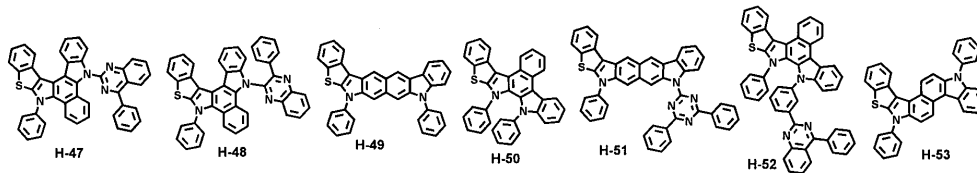
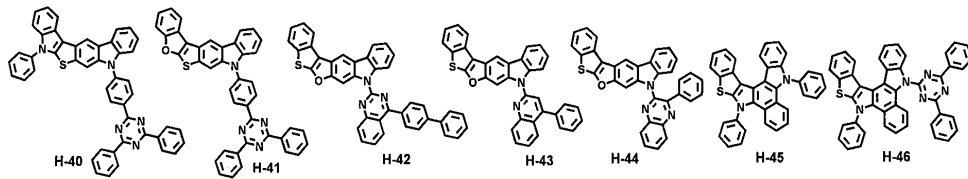
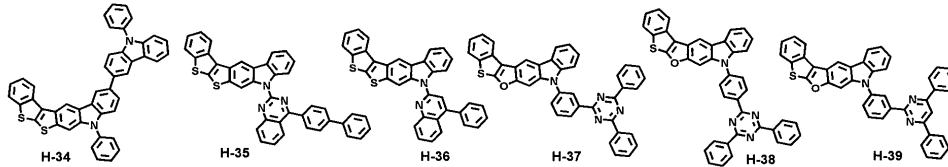
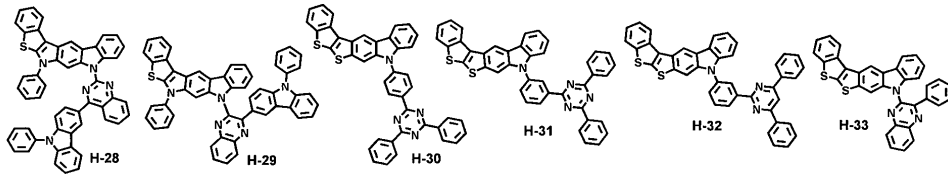
[0034]



[0035]

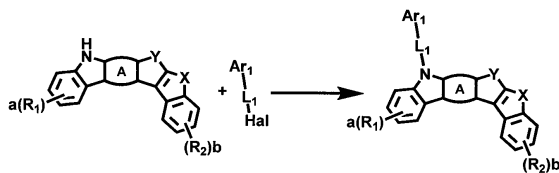


[0036]



본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 당업자에게 공지된 합성 방법으로 제조할 수 있으며, 예를 들면 하기 반응식 1에 따라 제조할 수 있다.

[반응식 1]



상기 반응식 1에서, X, Y, L₁, Ar₁, R₁, R₂, a, b 및 A고리는 화학식 1에서의 정의와 동일하고, Hal는 할로겐이다.

또한, 본 발명은 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 재료 및 상기 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 상기 재료는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 단독으로 이루어질 수 있고, 유기 전계 발광 재료에 포함되는 통상의 물질들을 추가로 포함할 수도 있다.

본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 갖고, 상기 유기물층은 본 발명의 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 하나 이상 포함할 수 있다.

상기 제1 전극과 제2 전극 중 하나는 애노드이고 다른 하나는 캐소드일 수 있다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 정공주입층, 정공전달층, 전자전달층, 전자주입층, 계면층(interlayer) 및 전자차단층에서 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.

본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 상기 발광층에 포함될 수 있다. 상기 발광층에 사용될 경우, 본 발명의 유기 전계 발광 화합물은 호스트 재료로서 포함될 수 있다.

[0049] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외의 하나 이상의 다른 화합물을 호스트 재료로서 더 포함할 수 있으며, 하나 이상의 도판트를 더 포함할 수 있다.

[0050] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물이 발광층의 호스트 재료(제1 호스트 재료)로서 포함되는 경우, 그 이외의 다른 화합물을 제2 호스트 재료로 포함할 수 있다. 이 때, 제1 호스트 재료와 제 2 호스트 재료의 중량비는 1:99 내지 99:1 범위이다.

[0051] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외의 다른 화합물의 호스트 재료는 공지된 인광 호스트라면 어느 것이든 사용 가능하나, 하기 화학식 11 내지 화학식 15로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 발광 효율 면에서 특히 바람직하다.

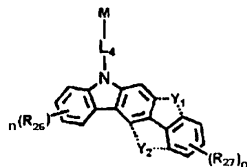
[0052] [화학식 11]

[0053] $H-(Cz-L_4)_1-M$

[0054] [화학식 12]

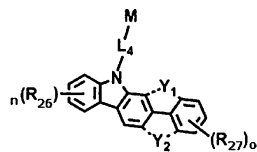
[0055] $H-(Cz)_m-L_4-M$

[0056] [화학식13]



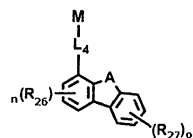
[0057]

[0058] [화학식 14]



[0059]

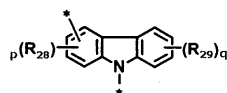
[0060] [화학식 15]



[0061]

[0062] 상기 화학식 11 내지 15에서,

[0063] Cz는 하기 구조이며,



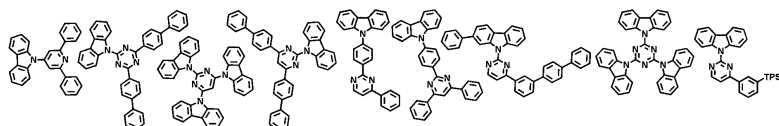
[0064]

[0065] A는 -O- 또는 -S-이고;

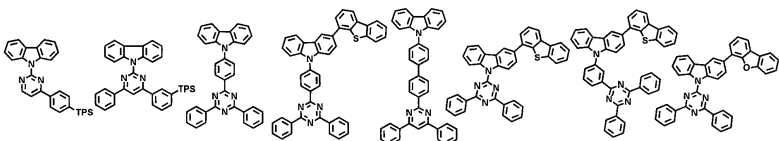
[0066] R₂₆ 내지 R₂₉는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴 또는 -SiR₃₀R₃₁R₃₂이며; R₃₀ 내지 R₃₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이고; L₄는 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴렌이고; M은 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이며; Y₁ 및 Y₂는 -O-, -S-, -N(R₃₃)-, 또는 -C(R₃₄)(R₃₅)-

이고, Y_1 과 Y_2 가 동시에 존재하지는 않으며; R_{33} 내지 R_{35} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (5-30원)헤테로아릴이고, R_{34} 및 R_{35} 는 동일하거나 상이할 수 있으며; 1 및 m은 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이고, n, o, p 및 q는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며, 1, m, n, o, p, 또는 q가 2 이상의 정수인 경우 각각의 (Cz-L₄), 각각의 (Cz), 각각의 R_{26} , 각각의 R_{27} , 각각의 R_{28} 또는 각각의 R_{29} 는 동일하거나 상이할 수 있다.

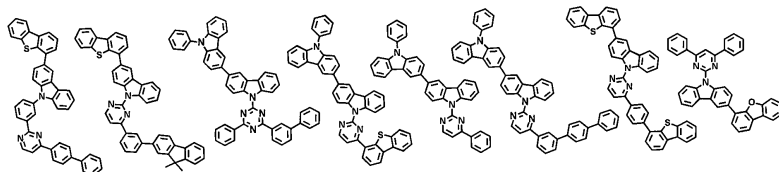
[0067] 구체적으로 상기 제2 호스트 재료의 바람직한 예는 다음과 같다.



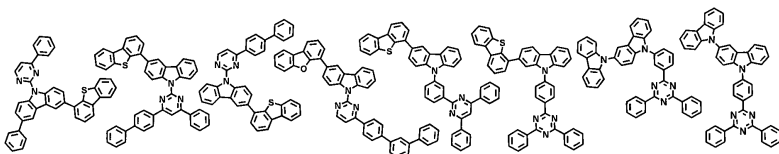
[0068]



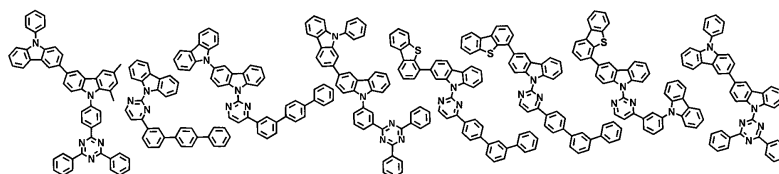
[0069]



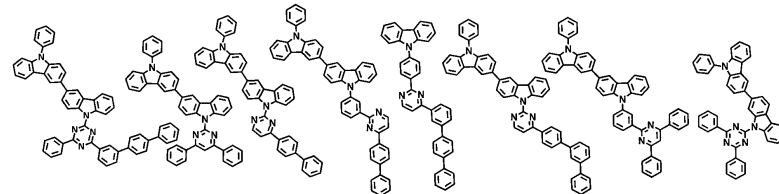
[0070]



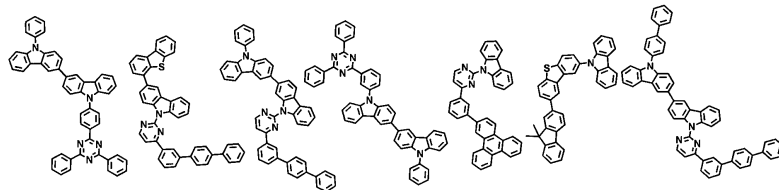
[0071]



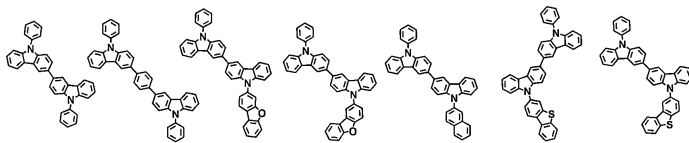
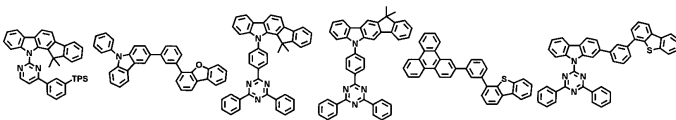
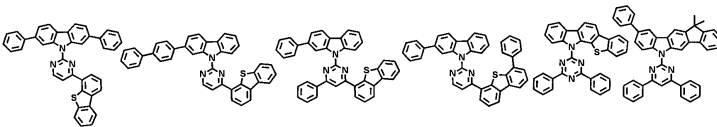
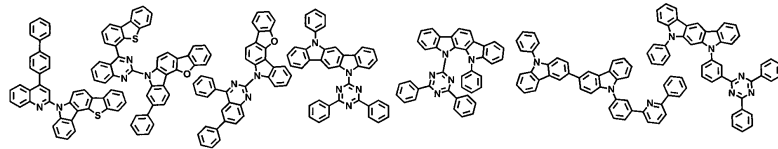
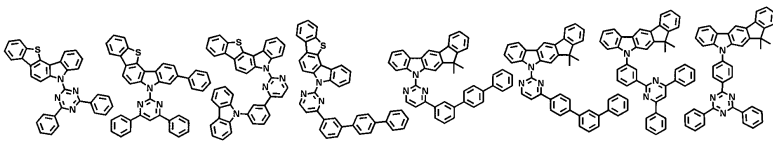
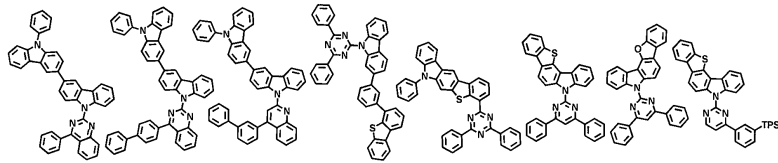
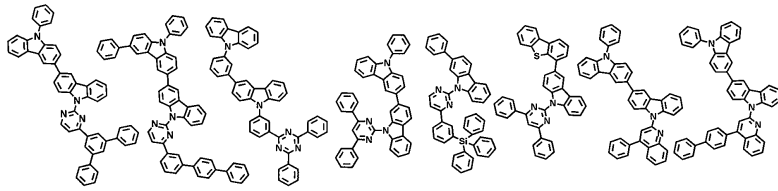
[0072]



[0073]



[0074]



[여기서, TPS는 트리페닐실릴(triphenylsilyl)기이다]

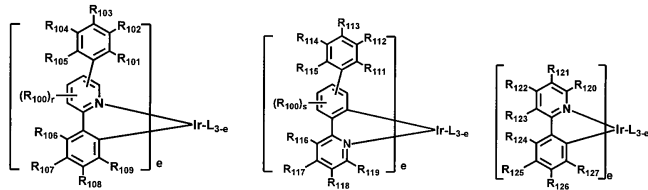
본 발명의 유기 전계 발광 소자에 포함되는 도판트로는 하나 이상의 인광 도판트가 바람직하다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트 재료는 특별히 제한되지는 않으나, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 착체 화합물이 바람직하고, 이리듐(Ir), 오스뮴(Os), 구리(Cu) 및 백금(Pt)으로부터 선택되는 금속 원자의 오르토 메탈화 착체 화합물이 더욱 바람직하며, 오르토 메탈화 이리듐 착체 화합물이 더더욱 바람직하다.

상기 인광 도판트는 하기 화학식 101 내지 화학식 103으로 표시되는 화합물로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

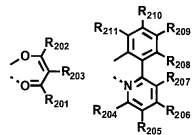
[화학식 101]

[화학식 102]

[화학식 103]



상기 화학식 101 내지 103에서, L은 하기 구조에서 선택되고;



R₁₀₀은 수소, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이며;

R₁₀₁ 내지 R₁₀₉ 및 R₁₁₁ 내지 R₁₂₃은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 시아노, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이고; R₁₀₆ 내지 R₁₀₉는 인접 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환(예: 플루오렌, 디벤조티오펜, 디벤조푸란)을 형성할 수 있으며; R₁₂₀ 내지 R₁₂₃는 인접 치환기와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 방향족 환(예: 퀴놀린)을 형성할 수 있고;

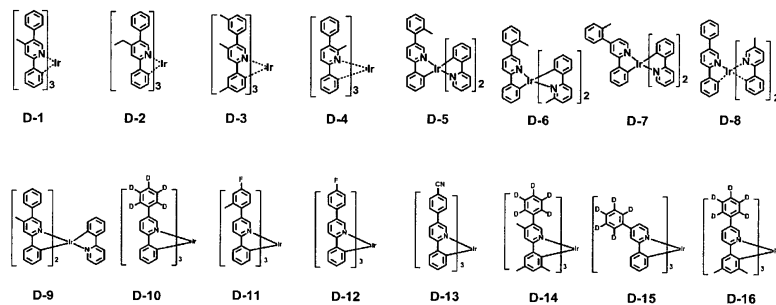
R₁₂₄ 내지 R₁₂₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이며; R₁₂₄ 내지 R₁₂₇은 인접기와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 (헤테로)방향족 환(예: 플루오렌, 디벤조티오펜, 디벤조푸란)을 형성할 수 있고;

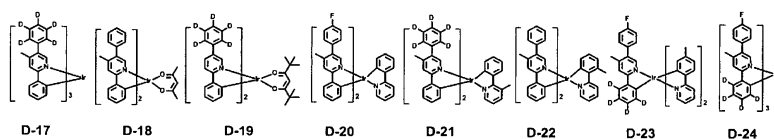
R₂₀₁ 내지 R₂₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 할로젠으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴이며, R₂₀₈ 내지 R₂₁₁은 인접기와 연결되어 치환 또는 비치환된 (C3-C30) 단일환 또는 다환의 치환족 또는 (헤테로)방향족 환(예: 플루오렌, 디벤조티오펜, 디벤조푸란)을 형성할 수 있고;

r 및 s는 각각 독립적으로 1 내지 3의 정수이며, r 또는 s가 각각 2이상의 정수인 경우 각각의 R₁₀₀은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

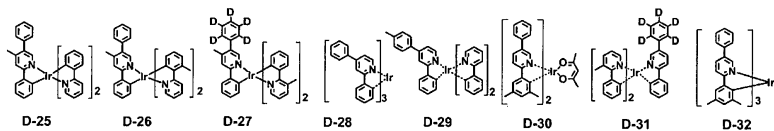
e는 1 내지 3의 정수이다.

상기 인광 도판트 재료의 구체적인 예로는 다음과 같다.

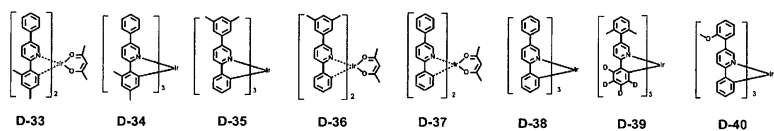




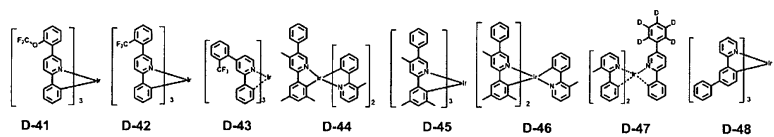
[0097]



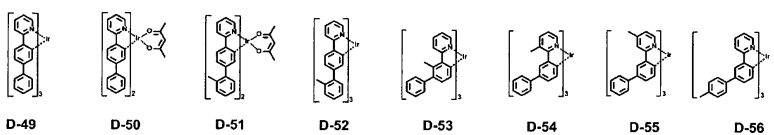
[0098]



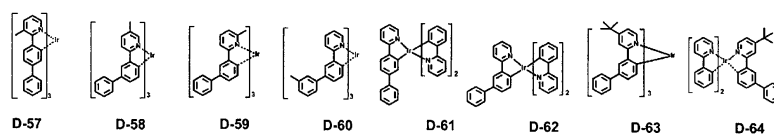
[0099]



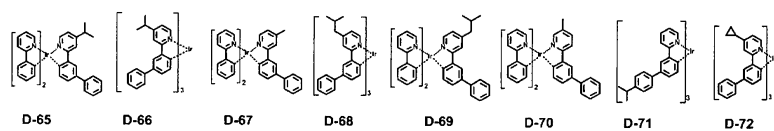
[0100]



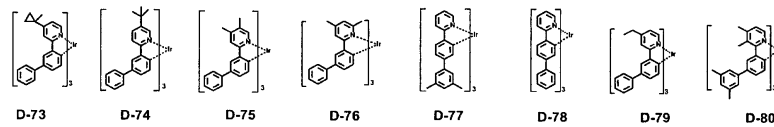
[0101]



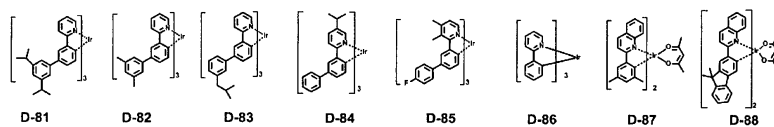
[0102]



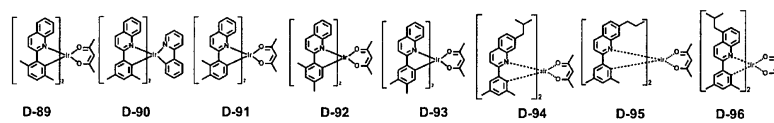
[0103]



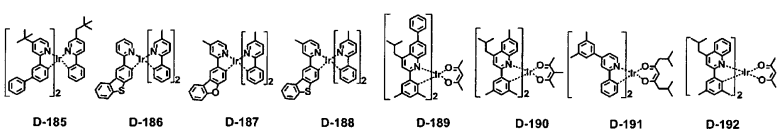
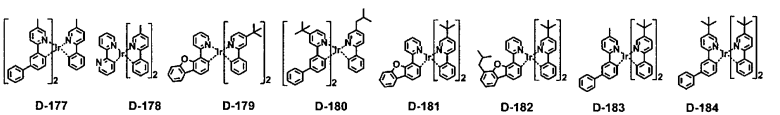
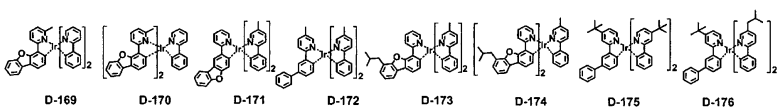
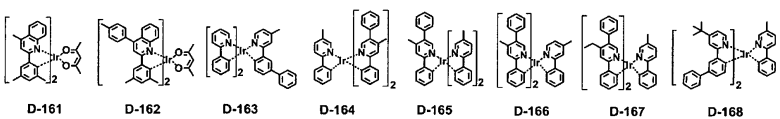
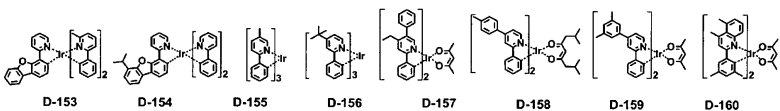
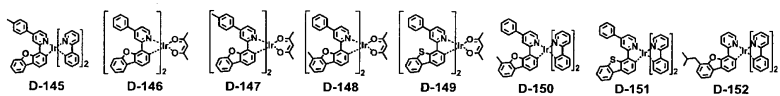
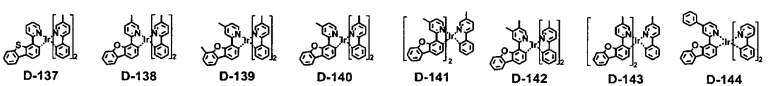
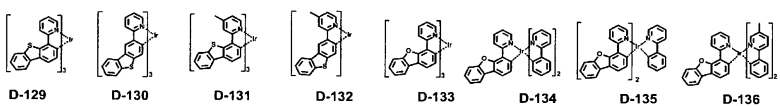
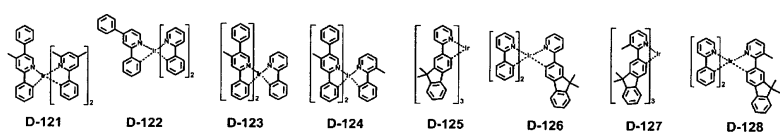
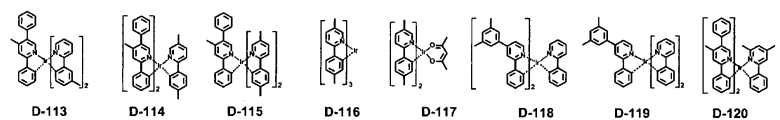
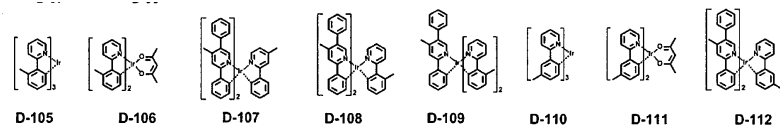
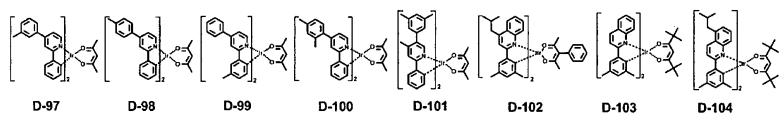
[0104]

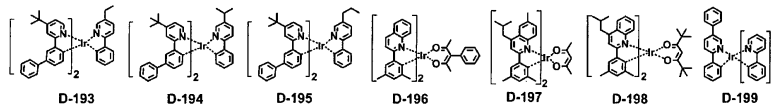


[0105]



[0106]





[0119]

[0120]

본 발명은 추가의 양태로 유기 전계 발광 소자 제조용 조성물을 제공한다. 상기 조성물은 호스트 재료로서 본 발명의 화합물을 포함한다.

[0121]

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층을 가지며, 상기 유기물층은 발광층을 포함하며, 상기 발광층은 본 발명의 유기 전계 발광 소자용 조성물을 포함할 수 있다.

[0122]

본 발명의 유기 전계 발광 소자는 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물을 포함하고, 이와 동시에 아릴아민계 화합물 및 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다.

[0123]

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 유기 전계 발광 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기 전이금속, 5주기 전이금속, 란타넘 계열 금속 및 d-전이원소의 유기 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 이의 착체 화합물을 더 포함할 수도 있고, 나아가 상기 유기물층은 발광층 및 전하생성층을 더 포함할 수 있다.

[0124]

또한, 본 발명의 상기 유기 전계 발광 소자는 본 발명의 유기 전계 발광 화합물 이외에 당업계에 알려진 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 발광층을 하나 이상 더 포함함으로써 백색 발광을 할 수 있다. 또한, 필요에 따라, 황색 또는 오렌지색 발광층을 더 포함할 수도 있다.

[0125]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측 표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 하나 이상의 층(이하, 이들을 “표면층”이라고 지칭함)을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광 매체층 측의 음극 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 상기 표면층에 의해 소자의 구동 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드의 바람직한 예로는 SiO_x ($1 \leq x \leq 2$), AlO_x ($1 \leq x \leq 1.5$), SiON , SiAlON 등이 있고, 할로겐화 금속의 바람직한 예로는 LiF , MgF_2 , CaF_2 , 불화 희토류 금속 등이 있으며, 금속 산화물의 바람직한 예로는 Cs_2O , Li_2O , MgO , SrO , BaO , CaO 등이 있다.

[0126]

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 수송 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 수송 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식에 의해 전자 수송 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 수송하기 용이해진다. 또한, 정공 수송 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 수송하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있고, 바람직한 환원성 도판트로는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 발광의 유기 전계 발광 소자를 제작할 수 있다.

[0127]

본 발명의 유기 전계 발광 소자의 각층의 형성은 진공증착, 스퍼터링, 플라즈마, 이온플레이팅 등의 건식 성막법이나 스핀 코팅, 침지 코팅(dip coating), 플로우 코팅 등의 습식 성막법 중의 어느 하나의 방법을 적용할 수 있다.

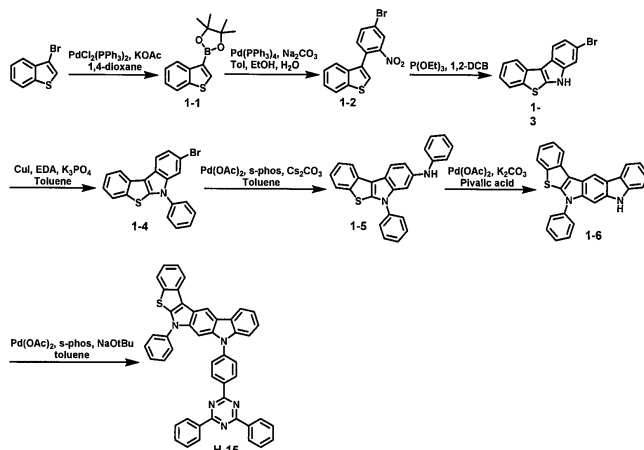
[0128]

습식 성막법의 경우, 각 층을 형성하는 재료를 에탄올, 클로로포름, 테트라하이드로푸란, 디옥산 등의 적절한 용매에 용해 또는 분산시켜 박막을 형성하는데, 그 용매는 각 층을 형성하는 재료가 용해 또는 분산될 수 있고, 성막성에 문제가 없는 것이라면 어느 것이어도 된다.

[0129]

이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물, 이의 제조방법 및 이를 포함하는 소자의 발광특성을 설명한다.

[0130] [실시예 1] 화합물 H-15의 제조



[0131]

[0132] 화합물 1-1의 제조

[0133] 3L 둥근 바닥 플라스크(RBF)에 3-브로모-[b]벤조티오펜 60g(281mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-바이(1,3,2-디옥사보롤란) 86g(337mmol), 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II) 디클로라이드($\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$) 10g(14mmol), 칼륨 아세테이트(KOAc) 69g(704mmol) 및 1,4-디옥산 1400ml를 넣고, 120℃ 하에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물은 에틸 아세테이트(EA)/H₂O로 후처리(work-up)하고, MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 조 생성물은 메틸렌 클로라이드(MC):헥산(Hx)으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 1-1 55g(75%)의 하얀색 고체를 얻었다.

[0134] 화합물 1-2의 제조

[0135] 3L RBF에 화합물 1-1 55g(211mmol), 2,5-디브로모니트로벤젠 83g(296mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$) 12.2g(10.5mmol), Na₂CO₃ 60.5g(570mmol), 톨루엔 1100ml, 에탄올 285 ml 및 물 285 ml를 넣어 녹인 뒤, 130℃ 하에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물은 EA/H₂O로 후처리하고, MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 조 생성물은 MC:Hx으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 1-2 40g(56%)의 노란색 액체를 얻었다.

[0136] 화합물 1-3의 제조

[0137] 2L RBF에 화합물 1-2 40g(120 mmol), 트리에틸포스파이트 400ml 및 1,2-디클로로로벤젠(1,2-DCB) 400ml를 넣고, 150℃ 하에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물은 증류하여 고체를 얻었다. 조 생성물은 MC:Hx으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 1-3 25g(70%)의 고체를 얻었다.

[0138] 화합물 1-4의 제조

[0139] 2L RBF에 화합물 1-3 25g(83mmol), 요오도벤젠 46ml(414mmol), CuI 7.9g(41mmol), 에틸렌디아민 11ml(165mmol), K₃PO₄ 52.6g(248mmol) 및 톨루엔 400ml를 넣어 녹인 뒤, 100℃ 하에서 1.5시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물은 EA/H₂O로 후처리하고, MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 조 생성물은 MC:Hx으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 1-4 17g(55%)의 하얀색 고체를 얻었다.

[0140] 화합물 1-5의 제조

[0141] 1L RBF에 화합물 1-4 15g(40mmol), 아닐린 5.4ml(60mmol), 팔라듐(II) 아세테이트($\text{Pd}(\text{OAc})_2$) 356mg(1.6mmol), 2-디사이클로헥실포스포노-2',6'-디메톡시바이페닐(s-phos) 1.3g(3.2mmol), Cs₂CO₃ 32.3g(100mmol) 및 톨루엔 200ml를 넣고, 130℃ 하에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물은 EA/H₂O로 후처리하고, MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 조 생성물은 MC:Hx으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 1-5 9g(59%)의 고체를 얻었다.

[0142] 화합물 1-6의 제조

[0143] 1L RBF에 화합물 **1-5** 8.5g(22mmol), Pd(OAc)₂ 224mg(1mmol), K₂CO₃ 300mg(2mmol) 및 피발산 110ml를 넣고, 140 °C 하에서 25시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물은 물에 역적가한 뒤, 감압여과하였다. 조 생성물은 MC:Hx으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 **1-6** 1.1g(12%)의 고체를 얻었다.

[0144] 화합물 H-15의 제조

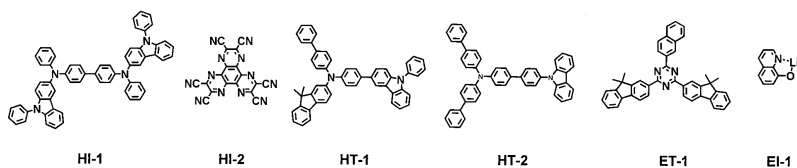
[0145] 100mL RBF에 화합물 **1-6** 1g(26mmol), 2-(4-브로모페닐)-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 1.3g(33mmol), Pd(OAc)₂ 30mg(0.13mmol), s-phos 110mg(0.25mmol), 나트륨 3급-부톡사이드(NaOt-Bu) 620mg(6.4mmol) 및 톨루엔 26ml를 넣고, 120 °C 하에서, 5시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물은 EA/H₂O로 후처리하고, MgSO₄로 수분을 제거한 후, 감압증류하였다. 조 생성물은 MC:Hx으로 컬럼 크로마토그래피하여 화합물 **H-15** 1g(50%)의 고체를 얻었다.

분자량	UV	PL	M.P.
696	440 nm	495 nm	319 °C

[0147] **[소자 실시예 1] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작**

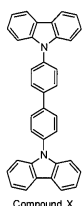
[0148] 본 발명의 유기 전계 발광 화합물을 이용하여 OLED 소자를 제조하였다. 우선, OLED용 글래스(지오마텍사 제조) 기판 상의 투명전극 ITO 박막(10Ω/□)을 아세톤, 에탄올 및 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로 진공 증착 장비의 기판 홀더에 ITO기판을 장착한 후, 진공 증착장비 내의 셀에 HI-1을 넣고 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 ITO 기판 위에 80 nm 두께의 제1 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 HI-2 을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공 주입층 위에 5 nm 두께의 제2 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 셀에 HT-1을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제2 정공 주입층 위에 10 nm두께의 제1 정공전달층을 증착하였다. 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 HT-2을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 제1 정공전달층 위에 60 nm 두께의 제2 정공 전달층을 증착하였다. 정공주입층, 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 화합물 H-15를 넣고, 또 다른 셀에는 도판트로서 화합물 D-96을 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 호스트와 도판트의 합계량에 대해 도판트를 3 중량%의 양으로 도핑함으로써 상기 제2 정공전달층 위에 40 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 또 다른 셀 두 군데에 ET-1 과 EI-1을 1:1의 속도로 증발시켜 발광층 위에 30 nm 두께의 전자전달층을 증착하였다. 이어서, 전자주입층으로 EI-1 를 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 80 nm의 두께로 증착하여 OLED 소자를 제조하였다

[0149] 그 결과, 4.6 V의 전압에서 17.8 cd/A의 효율을 보였으며, 5000 cd/m²의 적색 발광이 확인되었으며, 5000 nit의 휘도에서 발광이 75%로 떨어지는데 걸린 최소 시간이 14시간이었다.



[0150] **[비교예 1] 종래의 유기 전계 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제조**

[0152] 발광재료로서 호스트에는 하기의 compound X를 사용한 것 외에는 소자 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제조하였다.



[0154] 그 결과, 12.4 V의 전압에서 13.8 cd/A의 효율을 보였으며, 5000 cd/m²의 적색 발광이 확인되었으며, 5000 nit의 휘도에서 발광이 75%로 떨어지는데 걸린 시간이 4시간이었다.

[0155] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물은 종래의 유기 전계 발광 화합물에 비해 발광 효율이 우수하며, 구동 수명이 길다. 또한 본 발명에 따른 유기 전계 발광 화합물을 사용한 소자는 발광 특성, 특히 전류/전력 효율이 뛰어나다.

专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020160036504A	公开(公告)日	2016-04-04
申请号	KR1020150134438	申请日	2015-09-23
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	YANG JEONG EUN 양정은 KIM CHI SIK 김치식 KIM BITNARI 김빛나리		
发明人	양정은 김치식 김빛나리		
IPC分类号	C09K11/06 C07D495/14 C07D495/12 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D495/14 C07D495/12 H01L51/50 C09K2211/1011 C09K2211/1037		
代理人(译)	张本勋		
优先权	1020140128116 2014-09-25 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及一种新型有机电致发光化合物，并涉及包含该化合物的有机电致发光器件。与现有的有机电致发光化合物相比，根据本发明的有机电致发光化合物具有更高的发光效率。当用于有机EL器件的发光层时，本发明的化合物极好地平衡发光层中的空穴和电子的电荷，提高器件的电流/功率效率，并通过降低驱动电压延长寿命。有机电致发光化合物由化学式1.COPYRIGHT KIPO 2016表示

